

研究項目 A02：計画研究力

「 Γ 点上のディラックコーン生成条件の解明」

研究代表者 迫田 和彰（物質・材料研究機構）

マックスウェルの波動方程式が時間 (t) について二階の微分方程式なので、時間の進む向きを逆 ($t \rightarrow -t$) にしても方程式は不変であり（時間反転対称性）、時間を逆さまにたどる波も方程式の解である。このことを周期的な構造をもつメタマテリアルやフォトニック結晶に当てはめると、波数 \mathbf{k} の固有モードの周波数 ($\omega_{\mathbf{k}}$) とこれとは逆方向に進む、波数 $-\mathbf{k}$ の固有モードの周波数 ($\omega_{-\mathbf{k}}$) が等しいことが導かれる。したがって、 ω は \mathbf{k} の偶関数であり、特にブリルアンゾーンの原点 (Γ 点) 近傍で分散曲線 (ω を \mathbf{k} の関数として表した曲線) は放物線で近似できる。

しかし、これには例外があり、例えば傾きの等しい右上がり と 右下がりの二本の直線が Γ 点で交差する場合には、分散関係は直線的であり、かつ、時間反転対称性も満たされる (図1)。このような分散関係はマイクロ波分野で発見され、CRLH 伝送線路の名で知られている[1]。特にこの数年、2次元および3次元メタマテリアルなどにおける、 Γ 点上の等方的で直線的な光の分散関係 (ディラックコーン) が関心を集めている。本研究では、そのようなディラックコーンの生成条件を理論的に解明した[2-7]。

まず、ユニットセルの一次元配列から成るメタマテリアルを例にとって理論の要点を述べる[2]。図2はそのようなメタマテリアルの分散関係で、赤と青の分散曲線で表される2つのモードがある。一般に、2つのモードの周波数差 (BO) は試料構造を微調することで調節できる。メタマテリアルのユニットセルは一定の空間対称性をもって設計されることが多く、この例では C_{2v} 対称性 (長方形と同じ対称性) を仮定した。ユニットセルの対称性を反映して、固有モードも一定の空間対称性をもつ。一般に Γ 点ではモードの対称性が高く、 Γ 点近傍の \mathbf{k} ($\neq 0$) については対称性が低い。図2の例では、 Γ 点では2つのモードは異なる対称性 (A_1 と B_1) をもつが、 $\mathbf{k} \neq 0$ での対称性は \mathbf{k} を含む鏡映面に関する偶奇性のみであり、いずれのモードも偶である (Aモードと記す)。試料構造を調節して BO をゼロに近づけると、 Γ 点では2つのモードの対称性が異なるので波動関数は混じり合うことはなく、分散曲線は互いを素通り (交差) する。これに対して $\mathbf{k} \neq 0$ では両者は同じ A 対称なので、BO がゼロに近づくとつれて波動関数が混じり合い、分散曲線は互いに反発 (反交差) する。この交差と反交差のバランスによって、BO = 0 のときに Γ 点近傍で直線的な分散関係が出現する。この例のように、直線的な分散関係を得るためには Γ 点で2つのモードの

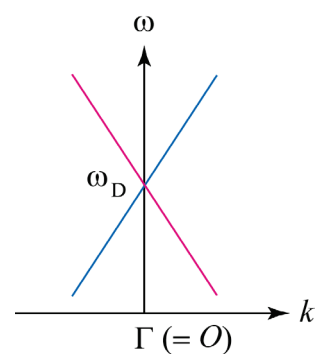
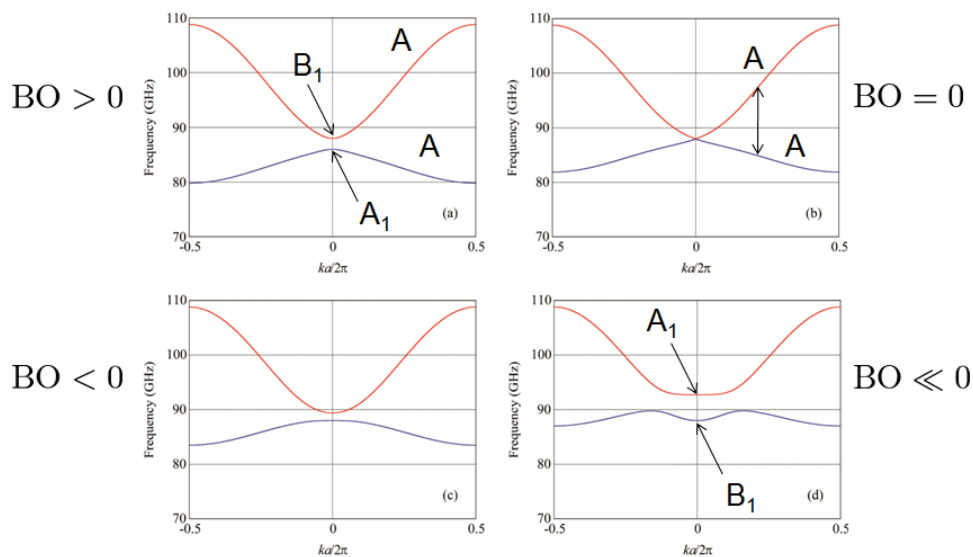


図1 ブリルアンゾーンの中央 (Γ 点) で交差する2本の分散曲線。 ω_D :ディラック点。


 図2 偶然縮退による線形の分散関係。横軸は波数 k , 縦軸は周波数。

周波数を一致させる必要があるが、これを物理用語では偶然縮退と呼ぶ。

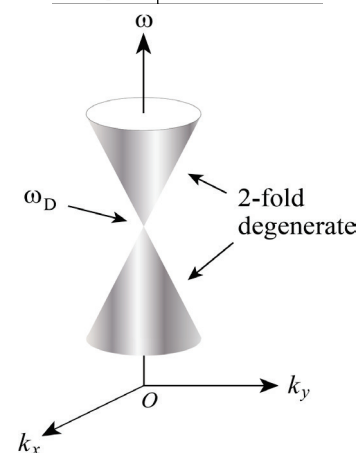
以上の結論は、1次元メタマテリアルのユニットセルに立つ共鳴状態を基底に用いた強束縛近似を使って導いたが[2]、同じ手法は2次元および3次元メタマテリアルの解析にも適用できる[3-5]。2次元系・3次元系では1次元系よりも高い空間対称性を実現できるので、いっそう多彩な分散関係が得られる。

例えば、 C_{4v} 対称性（正方形と同じ対称性）をもつ2次元メタマテリアルの場合、対称性によってもともと二重縮退したモード（Eモード）が存在する。これと全対称（ A_1 ）モードが偶然縮退すると等方的で直線的な分散関係（ディラックコーン）が生成する。その理由を直感的に説明すると以下のようなものである。まず、波数ベクトル $(k_x, 0)$ をもつ k_x 軸上のモードは x 軸を含む鏡映面について（対称操作 σ_y について）偶か奇でなければならないが、 A_1 モードは偶であり、また、Eモードの2つの固有関数のうちの1つが偶である。したがって、両者が反発し合っって線形の分散関係が生じる。 k_y 軸上ではもう一方の固有関数が y 軸を含む鏡映面について（対称操作 σ_x について）偶なので、やはり A_1 モードと反発して線形の分散関係が生じる。このような事情で等方的なディラックコーンが生じる。 O_h 対称（立方対称）な3次元メタマテリアルでも同じような原理で、3次元波数空間で等方的なディラックコーンが生成する[4]。

C_{6v} 対称性（正六角形の対称性）をもつ2次元メタマテリアルでは、さらに面白い分散曲線が得られる。 C_{6v} 対称の場合、もともと2重縮退したモードが2つ（ E_1 と E_2 ）存

 表1 A_1 モード ($\mathbf{H}^{(0)}$) と Eモード ($\mathbf{H}^{(1)}$, $\mathbf{H}^{(2)}$) の対称性

	σ_y	σ_x
$\mathbf{H}_0^{(0)}$	+1	+1
$\mathbf{H}_0^{(1)}$	+1	-1
$\mathbf{H}_0^{(2)}$	-1	+1


 図3 C_{6v} 対称な2次元メタマテリアルで実現される2重ディラックコーン

在する。それらが Γ 点で偶然縮退すると、 k_x 軸上と k_y 軸上でそれぞれ2組のモードの組合せで反発が生じる結果、2重ディラックコーン(2重縮退したディラックコーン、図3参照)が生じる[5]。 C_{4v} と O_h 対称の場合には、ディラックコーン以外に互いに反発せずに放物線の形状を維持するモードが残るのに対し、この場合には4つの固有モードから2重ディラックコーンだけが生成する。

ここまでのメタマテリアルの解析では、ユニットセルに立つ共鳴状態を基底に用いた強束縛近似を利用した。これに対して誘電体から成るフォトニック結晶については、平面波展開などの方法で分散曲線を数値計算で容易に求めることができる。図4はそのようにして求めた2次元3角格子フォトニック結晶の分散曲線である。 Γ 点上の偶然縮退によって、強束縛近似を用いてメタマテリアルで予測されたのと同じ分散関係が得られた[6]。このことから、ディラックコーンの生成/非生成は試料形状の詳細や共鳴状態の有無、あるいは、解析に利用した近似の種類等に関わらず、 Γ 点におけるモードの対称性だけで決定されると推測できた。そこで、モードの対称性だけを仮定して以下のような理論解析を行い、ディラックコーンの生成条件を完全に解明した[7]。

さて、波数 \mathbf{k} 、バンド指数 n の固有モードの磁場の固有関数を $\mathbf{H}_{\mathbf{k}n}$ と記すと、 $\mathbf{H}_{\mathbf{k}n}$ はマックスウェルの波動方程式から導かれる、次の固有値方程式を満たす。

$$\mathcal{L}\mathbf{H}_{\mathbf{k}n} \equiv \nabla \times \left[\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{H}_{\mathbf{k}n} \right] = \lambda_{\mathbf{k}n} \mathbf{H}_{\mathbf{k}n}$$

誘電率 ε が実数であれば、演算子 \mathcal{L} はエルミートである。ブロッホの定理から、 $\mathbf{H}_{\mathbf{k}n}$ はユニットセルと同じ周期をもつベクトル値関数と $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ の積であるが、前者はエルミート演算子

$$\Delta \mathcal{L}_{\mathbf{k}} \equiv \mathcal{L}_{\mathbf{k}} - \mathcal{L}_0 \approx \Delta \mathcal{L}_{\mathbf{k}}^{(1)} + \Delta \mathcal{L}_{\mathbf{k}}^{(2)}$$

$$\mathcal{L}_{\mathbf{k}} \equiv e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \mathcal{L} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = (\nabla + i\mathbf{k}) \times \left[\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} (\nabla + i\mathbf{k}) \times \right]$$

の固有関数であり、固有値は上と同じ $\lambda_{\mathbf{k}n}$ ($=\omega_{\mathbf{k}n}^2/c^2$) である。 $\mathcal{L}_{\mathbf{k}}$ がエルミートであることから、固有関数は完全系をなすが、特に $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ の固有関数の全体、 $\{\mathbf{u}_{0n} | n = 1, 2, \dots\}$ を完全正規直交系にとることができる。そこで、この完全正規直

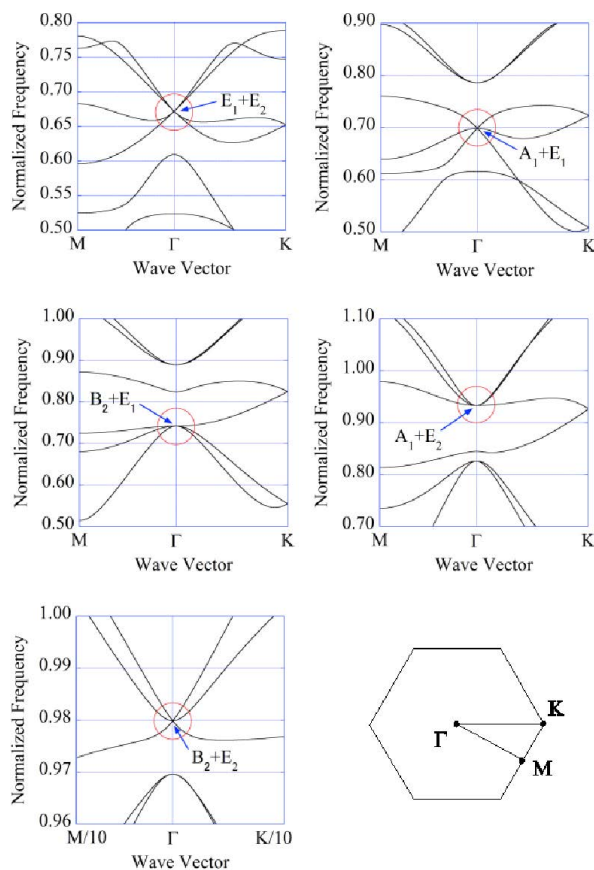


図4 誘電体中の空洞円柱から成る2次元3角格子フォトニック結晶の分散関係[6]



交系を基底に用いて、 Γ 点の周りで固有値問題を摂動計算し、固有周波数を \mathbf{k} の 1 次まで求めることができれば、ディラックコーンの有無が判定できる。摂動演算子は

$$\Delta\mathcal{L}_{\mathbf{k}}^{(1)} = i\mathbf{k} \times \left[\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \right] \quad \Delta\mathcal{L}_{\mathbf{k}}^{(2)} = \nabla \times \left[\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} i\mathbf{k} \times \right]$$

であり、1 次摂動の $\lambda_{\mathbf{k}n}$ が

$$C_{ij}^{(\mathbf{k})} = \langle \mathbf{u}_{0i} | \Delta\mathcal{L}_{\mathbf{k}} | \mathbf{u}_{0j} \rangle_0 = i\mathbf{k} \cdot (-\mathbf{P}_{ij} + \mathbf{P}_{ji}^*)$$

を (ij) 要素とする行列 $\mathbf{C}^{(\mathbf{k})}$ の固有値で与えられることが証明できる。さらに、試料構造を不変に保つ対称操作の全体 (点群) を \mathbf{G} 、任意の対称操作を \mathbf{R} ($\in \mathbf{G}$) として、

$$\begin{aligned} \mathbf{k} \cdot \mathbf{P}_{ij} &= \frac{1}{V_0} \mathbf{k} \cdot \int_{V_0} d\mathbf{r} \mathbf{u}_{0i}^*(\mathbf{r}) \times \left[\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{u}_{0j}(\mathbf{r}) \right] \\ &\equiv \mathbf{k} \cdot \langle \mathbf{u}_{0i} | \Delta\mathcal{L} | \mathbf{u}_{0j} \rangle_0 \\ &= (\mathbf{R}\mathbf{k}) \cdot \langle \mathcal{R}\mathbf{u}_{0i} | \Delta\mathcal{L} | \mathcal{R}\mathbf{u}_{0j} \rangle_0 \end{aligned}$$

を導くことができる。したがって、最右辺がすべての対称操作 \mathbf{R} について不変な項 (全対称表現) を含まなければ $\mathbf{C}^{(\mathbf{k})}$ はゼロ行列であり、1 次の固有値もゼロである。この場合には分散曲線は \mathbf{k} に比例する項を含まず、ディラックコーンは存在しない。固有関数 \mathbf{u}_{0i} と \mathbf{u}_{0j} は $L_{\mathbf{k}}$ の固有関数で \mathbf{R} による変換性は既知であり、また、波数ベクトル \mathbf{k} の変換性も容易に求めることができる。全対称表現が含まれるかどうかは群論を用いて容易に判別できるので、上式の最右辺はたいへん効率的なディラックコーン生成の判別条件を与える。さらに、この式から $\mathbf{C}^{(\mathbf{k})}$ の要素が満たすべき多くの関係式が得られ、 $\mathbf{C}^{(\mathbf{k})}$ の構造はモードの対称性からほとんど一意的に決定される[7]。以上を C_{6v} 対称な場合に適用して表 2 の結果を得たが、先に数値計算や強束縛近似で得た結論がすべて再現できた。また、 O_h 対称な場合にも 2 重ディラックコーンが得られることなどが新たに分かった[7]。

ディラック点では実効的屈折率がゼロであり、無散乱光導波路などの実現が期待されることから、今後、そのようなデバイスの実現に向けて試料作製を試みる予定である。

表 2 C_{6v} 対称なメタマテリアルやフォトニック結晶の Γ 点上の偶然縮退による分散曲線の形状。D: ディラックコーン, DD: 2 重ディラックコーン, Q: 放物線

Mode 1	Mode 2	$C_{ij}^{(\mathbf{k})}$	Dispersion
E_1	E_2	○	DD
E_1	E_1	×	4Q
E_2	E_2	×	4Q
E_1	A_1, A_2	○	D + Q
E_2	B_1, B_2	○	D + Q
E_2	A_1, A_2	×	3Q
E_1	B_1, B_2	×	3Q
A_1, A_2, B_1, B_2	A_1, A_2, B_1, B_2	×	2Q



【引用文献】

- [1] C. Caloz & T. Itoh, *Electromagnetic Metamaterials: Transmission Line Theory and Microwave Applications* (Wiley, 2006).
 - [2] K. Sakoda and H-F. Zhou, “Role of structural electromagnetic resonances in a steerable left-handed antenna”, *Opt. Express* **18**, 27371 (2010).
 - [3] K. Sakoda and H-F. Zhou, “Analytical study of two-dimensional degenerate metamaterial antennas”, *Opt. Express* **19**, 13899 (2011).
 - [4] K. Sakoda, “Dirac cone in two- and three-dimensional metamaterials”, *Opt. Express* **20**, 3898 (2012).
 - [5] K. Sakoda, “Double Dirac cones in triangular-lattice metamaterials”, *Opt. Express* **20**, 9925 (2012).
 - [6] K. Sakoda, “Universality of mode symmetries in creating photonic Dirac cones”, *J. Opt. Soc. Am B* **29**, 2770 (2012).
 - [7] K. Sakoda, “Proof of the universality of mode symmetries in creating photonic Dirac cones”, *Opt. Express* **20**, 25181 (2012).
-